



Simulation Monte-Carlo du Modèle de Hubbard à deux dimensions

Bernard Martinie

► To cite this version:

Bernard Martinie. Simulation Monte-Carlo du Modèle de Hubbard à deux dimensions. 2008. hal-00328142

HAL Id: hal-00328142

<https://hal.science/hal-00328142>

Preprint submitted on 9 Oct 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Simulation Monte-Carlo du modèle de Hubbard à deux dimensions

9 octobre 2008

Bernard Martinie

Département de Physique, UFR Sciences et Techniques, Parc Grandmont, 37200 Tours, France
martinie@univ-tours.fr

Résumé

Les résultats de simulations Monte-Carlo du modèle de Hubbard à deux dimensions à demi-remplissage sont présentés. La méthode de simulation utilisée est celle proposée par Suzuki et al, et Hirsch et al.. Les états générés par cette méthode sont des états de base dans la représentation en nombres d'occupation basée sur les états de Wannier localisés autour de chaque site du réseau carré. Les configurations des fermions sur le réseau 2D réel peuvent être observées. Un facteur d'antiferromagnétisme a pu être défini et calculé pour chaque température. Les courbes d'énergie, de chaleur spécifique, de conductivité et de facteur d'antiferromagnétisme en fonction de la température sont présentées pour différentes valeurs de l'interaction répulsive coulombienne sur site U (avec $t = 1$). Pour les faibles valeurs de U le modèle présente une transition métal-isolant à basse température. Cette transition correspond à une transition paramagnétique-ferromagnétique du premier ordre. En effet, pour ces valeurs de l'interaction, les courbes d'énergie comportent un décalage qui est caractéristique d'une transition du premier ordre. De même, les courbes de conductivité font apparaître un phénomène d'hystérésis qui confirme la nature de la transition. Il apparaît un changement de comportement pour $U/t \sim 3.5$. La transition change de nature. Pour les valeurs $U > 3.5$ le passage ferromagnétique-paramagnétique subsiste toujours mais sans influence sur l'énergie et la chaleur spécifique. La transition métal-isolant n'existe plus, la conductivité restant faible. Les réseaux d'isothermes des différentes grandeurs, en fonction de U/t , font apparaître une transition qui semble correspondre à la transition métal-isolant de Mott. Ces résultats permettent de tracer un diagramme de phase avec deux lignes de transition du premier ordre.

Abstract

The Quantum Monte-Carlo simulations of the two-dimensional Hubbard model are presented for the half filling. The method based on the direct-space proposed by Suzuki and al., and Hirsch and al. was used. The states generated by this method are basis states in occupation number representation built with Wannier states localised on each site of the square array. The configurations of fermions can be observed on the real 2D array. An antiferromagnetic factor is defined and calculated for each temperature. The curves of energy, specific heat, conductivity and antiferromagnetic factor are presented for different values of the repulsive coulombian on site interaction U . There is a metal-insulator transition at low temperature for small values of U . This transition corresponds with a paramagnetic-ferromagnetic first order transition. Indeed, for these interaction values, the energy curves show a gap which is a characteristic of a first order transition. An hysteresis phenomenon appears on the conductivity curves. There is a behaviour change for $U/t \sim 3.5$. For the values $U > 3.5$ there is ferromagnetic-paramagnetic change without observable effect on the energy and the specific heat. The metal-insulator transition does not exist any more, the conductivity stays very small. Isotherms of the physical quantities versus U/t show a transition which seems to be the metal-insulator Mott transition. These results allow to draw a phase diagram with two first order transition lines.

PACS numbers: 71.10.Fd Lattice fermion models, 71.27.+a Strongly correlated electron systems; heavy fermions, 71.30.+h Metal-insulator transitions and other electronic transitions

1 Introduction

Le modèle de Hubbard à deux dimensions est certainement le modèle le plus simple pour décrire le comportement d'un système de fermions fortement corrélés. Il semble suffisant pour expliquer la transition de phase métal-isolant prévue par Mott. La solution exacte de ce modèle n'étant pas connue il a été étudié avec de nombreuses méthodes analytiques et numériques [1–17].

Un grand nombre de ces résultats approchés ont été obtenus par des simulations numériques réalisées avec la méthode de Monte-Carlo quantique appelée méthode du déterminant. Cette méthode basée sur la formule de Trotter-Suzuki utilise la transformation de Hubbard-Stratonovich [20, 21].

Dans cet article nous présentons les résultats de simulation obtenus par une autre méthode de Monte-Carlo, proposée par Suzuki [22, 23] et Hirsch [24, 25]. Cette méthode permet de générer des configurations des fermions dans l'espace réel ce qui n'est pas le cas pour les autres méthodes numériques. Cette nouvelle méthode, qui est la version 2D de la méthode des *“world lines”*, nous a permis de retrouver le comportement général prévu par les autres méthodes et d'obtenir des résultats complémentaires.

Cet article est organisé comme il suit :

- dans la section 2 nous présentons les paramètres du modèle simulé,
- la méthode est rappelée dans la section 3,
- les résultats sont présentés dans la section 4,
- nous analysons les résultats dans la section 5,
- la conclusion est donnée dans la dernière section.

2 Modèle de Hubbard

Le modèle étudié est un réseau carré. Les états monoparticulaires utilisés pour construire les états de base $|\Psi_i\rangle$ dans la représentation en nombre d'occupation sont les états de Wannier localisés sur les sites. L'hamiltonien de Hubbard est

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + hc) + U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \quad (1)$$

où les opérateurs $c_{i,\sigma}^\dagger$ et $c_{i,\sigma}$ sont les opérateurs de création et d'annihilation d'un fermion de spin σ sur le site i . $\langle i, j \rangle$ indique que la sommation porte sur les premiers voisins.

3 Méthode numérique

La méthode de simulation est celle développée dans la référence [26]. Son principe est présenté dans les références [23–25]. Nous en rappelons les principales caractéristiques.

3.1 Principe de la méthode de simulation

Dans l'ensemble canonique la valeur moyenne d'une observable, O , est donnée par

$$\langle O \rangle = \text{tr}(DO) \quad (2)$$

où D est l'opérateur densité et Z est la fonction de partition.

$$D = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (3)$$

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta H}) \quad (4)$$

$\beta = 1/k_B T$ est l'inverse de la température. L'interaction de saut t introduit des éléments non-diagonaux, en conséquence les états propres du hamiltonien H (Eq.(1)), ne sont pas les états de base. Aussi le calcul de la trace dans les équations Eqs.(2) et (4) est très problématique. La méthode proposée par Suzuki et Hirsch permet de contourner cette difficulté [22, 24].

L'hamiltonien du système est décomposé en plusieurs sous-hamiltoniens H_r . A cause des relations d'anticommution certains de ces sous-hamiltoniens ne commutent pas. Cette décomposition n'est pas totalement arbitraire, les sous-hamiltoniens sont choisis tels qu'ils peuvent être eux-mêmes décomposés en plusieurs sous-systèmes sans site commun dont les hamiltoniens $K_{r,k}$ commutent.

$$H = \sum_{r=1}^p H_r \quad [H_r, H_{r'}] \neq 0 \quad r \neq r' \quad (5)$$

$$H_r = \sum_{k=1}^{m_r} K_{r,k} \quad [K_{r,k}, K_{r,k'}] = 0 \quad \forall k, k' \quad (6)$$

Les décompositions précédentes sont réalisées dans l'intention d'utiliser la formule de Trotter, Eq.(7), qui permet de contourner le problème de la non-commutativité des sous-hamiltoniens H_r .

$$\exp\left(-\beta \sum_{r=1}^p H_r\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\prod_{r=1}^p \left[\exp\left(-\frac{\beta}{n} H_r\right) \right] \right]^n \quad (7)$$

En utilisant la formule de Trotter, la fonction de partition Z s'écrit

$$Z = \lim_{n \rightarrow \infty} Z_n \quad (8)$$

où Z_n est un approximant de la fonction de partition

$$Z_n = \text{tr} \left\{ \left[\prod_{r=1}^p \left[\exp\left(-\frac{\beta}{n} H_r\right) \right] \right]^n \right\} \quad (9)$$

En insérant np ensembles complets d'états de base entre les opérateurs, l'approximant Z_n devient

$$\begin{aligned} Z_n = \sum_{\{\Psi_\alpha\}} & \langle \Psi_0 | \exp\left(-\frac{\beta}{n} H_p\right) | \Psi_{np-1} \rangle \\ & \langle \Psi_{np-1} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} H_{p-1}\right) | \Psi_{np-2} \rangle \\ & \dots \langle \Psi_1 | \exp\left(-\frac{\beta}{n} H_1\right) | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (10)$$

$[\Psi_\alpha]$ représente la configuration des np états $|\Psi_j\rangle$, et peut être considéré comme l'état d'un système classique de dimension $(d+1)$, où d est la dimension du système quantique étudié. $\{\Psi_\alpha\}$ indique que la somme porte sur toutes les configurations possibles. Ceci est équivalent à diviser le temps imaginaire τ , tel que $0 \leq \tau \leq \beta$, en n intervalles

de durée $\Delta\tau = \beta/n$. On détermine un approximant de l'énergie du système à partir de la relation

$$U_n = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_n = -\frac{1}{Z_n} \frac{\partial Z_n}{\partial\beta} \quad (11)$$

En remplaçant Z_n par Eq.(10), on obtient :

$$U_n = \sum_{\{\Psi_\alpha\}} P_n([\Psi_\alpha]) E_n([\Psi_\alpha]) \quad (12)$$

$$E_n([\Psi_\alpha]) = \sum_{j=0}^{np-1} \frac{\langle \Psi_{j+1} | \frac{H_r}{n} \exp\left(-\frac{\beta}{n} H_r\right) | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_{j+1} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} H_r\right) | \Psi_j \rangle} \quad (13)$$

$$P_n([\Psi_\alpha]) = \frac{1}{Z_n} \langle \Psi_0 | \exp\left(-\frac{\beta}{n} H_p\right) | \Psi_{np-1} \rangle \dots \langle \Psi_1 | \exp\left(-\frac{\beta}{n} H_1\right) | \Psi_0 \rangle \quad (14)$$

L'indice r du sous-hamiltonien qui apparaît dans chaque élément de matrice est fonction de l'indice de l'état j , tel que $r = 1 + (j \bmod p)$. Le calcul de la trace impose des conditions périodiques sur les états, ainsi le ket $|\Psi_0\rangle$ correspond au ket $|\Psi_{np}\rangle$. Les facteurs P_n vérifient

$$\sum_{\{\Psi_\alpha\}} P_n([\Psi_\alpha]) = 1 \quad (15)$$

On peut ainsi considérer que chaque configuration $[\Psi_\alpha]$ du système de dimension $(d+1)$ a une énergie $E_n([\Psi_\alpha])$ et un facteur de probabilité $P_n([\Psi_\alpha])$. Le calcul de la valeur moyenne de l'énergie du système est réalisé en utilisant une méthode de Monté-Carlo telle que l'algorithme de Metropolis.

En utilisant la relation (6), la valeur de U_n s'écrit :

$$U_n \approx \frac{1}{N_p} \sum_{\alpha=1}^{N_p} E_{n,\alpha} = \langle E_{n,\alpha} \rangle \quad (16)$$

$$E_{n,\alpha} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{r=1}^p \sum_{k=1}^{m_r} \frac{\langle \Psi_{j+1} | K_{r,k} \exp\left(-\frac{\beta}{n} \sum_l K_{r,l}\right) | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_{j+1} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} \sum_l K_{r,l}\right) | \Psi_j \rangle} \quad (17)$$

où N_p est le nombre de configurations retenues, α est l'indice des configurations qui remplace $[\Psi_\alpha]$ et i est l'indice des intervalles de temps. Les indices i, j et r sont reliés par le principe de numérotation des np états $|\Psi_j\rangle$ et vérifient

$$j = (i-1)p + r - 1 \quad (18)$$

La décomposition des sous-hamiltoniens H_r en sous-systèmes permet de réaliser une simplification importante. Cette simplification nécessite une approximation. Tous les hamiltoniens $K_{r,l}$ des sous-systèmes d'un même sous-hamiltonien H_r commutent et chaque hamiltonien $K_{r,l}$ agit seulement sur l'état d'un seul sous-système aussi chaque dénominateur de l'expression (17) peut s'écrire

$$\langle \Psi_{j+1} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} \sum_{l=1}^{m_r} K_{r,l}\right) | \Psi_j \rangle \longrightarrow \prod_{l=1}^{m_r} \langle \varphi_{j+1,l} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} K_{r,l}\right) | \varphi_{j,l} \rangle \quad (19)$$

où l'état $|\varphi_{j,l}\rangle$ est l'état du sous-système d'indice l du sous-hamiltonien d'indice r de l'intervalle de temps d'indice i . Le symbole \longrightarrow signifie que l'expression du membre de gauche est remplacée par celle du membre de droite. Cette opération implique que l'espace des états du système est considéré comme le produit tensoriel des espaces des états de tous les sous-systèmes. Ceci n'est pas correcte pour un système de fermions, en effet, à cause de l'antisymétrie des états, les opérateurs création et annihilation sont définis dans l'espace des états de tout le système. Il n'y a pas une égalité stricte entre ces deux expressions. Implicitement ceci signifie que les nombres d'occupation des autres états monoparticulaires ne sont pas pris en compte.

Etant donné la forme particulière des hamiltoniens, cette approximation peut, selon les valeurs des nombres d'occupation des états monoparticulaires, changer le signe de certains éléments non-diagonaux des $K_{r,l}$.

Si le nombre de types de sous-systèmes est faible, cette simplification permet de réduire considérablement les calculs en diminuant les dimensions de l'espace des états où sont mené ces calculs. En effet, la diagonalisation du hamiltonien H de tout le système dans l'espace des états de dimension 2^N , où N est le nombre de sites de tout le système, est remplacée par la diagonalisation des hamiltoniens $K_{r,k}$ de quelques sous-systèmes, dont les espaces des états sont de très petites dimensions comparées à 2^N . On applique la même factorisation pour le numérateur de l'équation Eq. (17). Les expressions calculées sont finalement :

$$U'_n = \langle E'_{n,\alpha} \rangle \quad (20)$$

$$E'_{n,\alpha} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{r=1}^p \sum_{k=1}^{m_r} \frac{\langle \varphi_{j+1,k} | K_{r,k} \exp\left(-\frac{\beta}{n} K_{r,k}\right) | \varphi_{j,k} \rangle}{\langle \varphi_{j+1,k} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} K_{r,k}\right) | \varphi_{j,k} \rangle} \quad (21)$$

avec

$$P'_{n,\alpha} = \frac{1}{Z'_n} \prod_{i=1}^n \prod_{r=1}^p \prod_{k=1}^{m_r} \langle \varphi_{j+1,k} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} K_{r,k}\right) | \varphi_{j,k} \rangle \quad (22)$$

$$Z'_n = \sum \prod_{i=1}^n \prod_{r=1}^p \prod_{k=1}^{m_r} \langle \varphi_{j+1,k} | \exp\left(-\frac{\beta}{n} K_{r,k}\right) | \varphi_{j,k} \rangle \quad (23)$$

Certains facteurs de probabilité $P_n([\Psi_\alpha])$ où $P'_{n,\alpha}$ sont négatifs : c'est le "*problème du signe*". Nous avons montré dans la référence [26] qu'on peut ne pas tenir compte de ce signe.

La chaleur spécifique est déterminée à partir de la formule

$$c = -k_B \beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} \quad (24)$$

où k_B est la constante de Boltzman.

En utilisant une méthode similaire à celle utilisée pour U'_n on obtient une formule qui permet de calculer la chaleur spécifique à partir des fluctuations

$$\frac{C}{R} \approx \beta^2 \langle (E'_{n,\alpha} - U'_n)^2 \rangle \quad (25)$$

où C est la chaleur spécifique molaire et R la constante des gaz parfaits.

3.2 Conductivité statique

La méthode de simulation ne permet pas de faire une détermination rigoureuse de la conductivité statique. En effet, l'opérateur densité de courant défini par Scalapino and al. [28] n'est pas diagonal et ne peut pas être décomposé en opérateur relatif à chaque sous-système [25]. Cependant, on obtient une valeur approchée de la densité de courant au temps imaginaire $\tau = \frac{\beta}{np}j$, en calculant :

$$j_x(l; j) = \frac{\sum_{\sigma} n_{\sigma, l; j} (1 - n_{\sigma, l'; j}) n_{\sigma, l'; j'}}{(1 - n_{\sigma, l; j'}) - n_{\sigma, l'; j} (1 - n_{\sigma, l; j})} n_{\sigma, l; j'} (1 - n_{\sigma, l'; j'}) \quad (26)$$

$j' = j + p$ où p est le nombre de sous-hamiltoniens. Les coordonnées des sites l et l' vérifient $x_{l'} = x_l + 1$ et $y_{l'} = y_l$. $n_{\sigma, l; j}$ est le nombre d'occupation de l'état monoparticulaire $|\sigma, l\rangle$ du réseau 2D d'indice j . Cette formule de calcul de $j_x(l; j)$ correspond à l'expression

$$\langle \psi_{j'} | \sum_{\sigma} c^{\dagger}_{\sigma, l'} c_{\sigma, l} - c^{\dagger}_{\sigma, l} c_{\sigma, l'} | \psi_j \rangle \quad (27)$$

où l'état $|\psi_j\rangle$ correspond à l'état des sites l et l' . La conductivité calculée est :

$$\Lambda_{xx}(m) = \frac{1}{np} \sum_{j=1}^{np} \sum_{l=1}^N j_x(l; j) j_x(l; j + m) \quad (28)$$

où N est le nombre de sites du système. La conductivité statique est obtenue après une transformation de Fourier discrète.

3.3 Facteur d'antiferromagnétisme

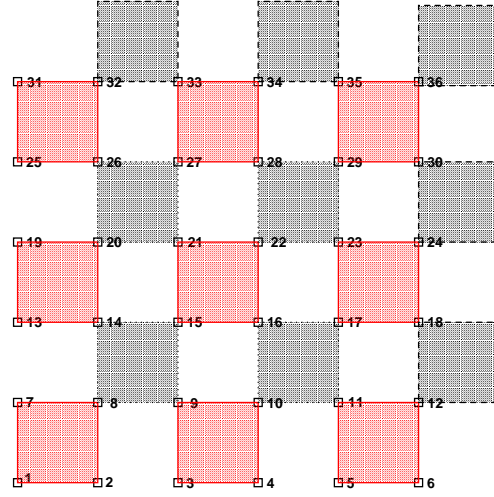
Pour chaque température la fonction de corrélation de spin $c(l_x, l_y)$ est calculée

$$c(l_x, l_y) = \langle ((n_{i, \uparrow} - n_{i, \downarrow})(n_{i+l, \uparrow} - n_{i+l, \downarrow})) \rangle \quad (29)$$

$\langle \dots \rangle$ signifie que, pour chaque configuration retenue, on calcule la moyenne pour tous les N sites de chaque réseau 2D et pour tous les réseaux 2D de cette configuration. La fonction finale correspond à la moyenne sur toutes les configurations retenues à une même température. l représente le changement d'indice des sites provoqué par la translation de vecteur (l_x, l_y) sur le réseau. Le facteur d'antiferromagnétisme (paramètre d'ordre de Néel) est déduit de la fonction de corrélation de spin tel que

$$f_A = \frac{1}{N} \sum_{l_x, l_y} (-1)^{(l_x + l_y)} c(l_x, l_y) \quad (30)$$

Dans le cas d'un ordre antiferromagnétique ce facteur est tel que $f_A = 1$, par contre, il n'est pas rigoureusement nul pour une absence totale d'ordre. En effet, le terme correspondant à $l_x = l_y = 0$ n'est pas éliminé dans notre définition de ce facteur. Cette contribution est de l'ordre de $\sim 1/N$.



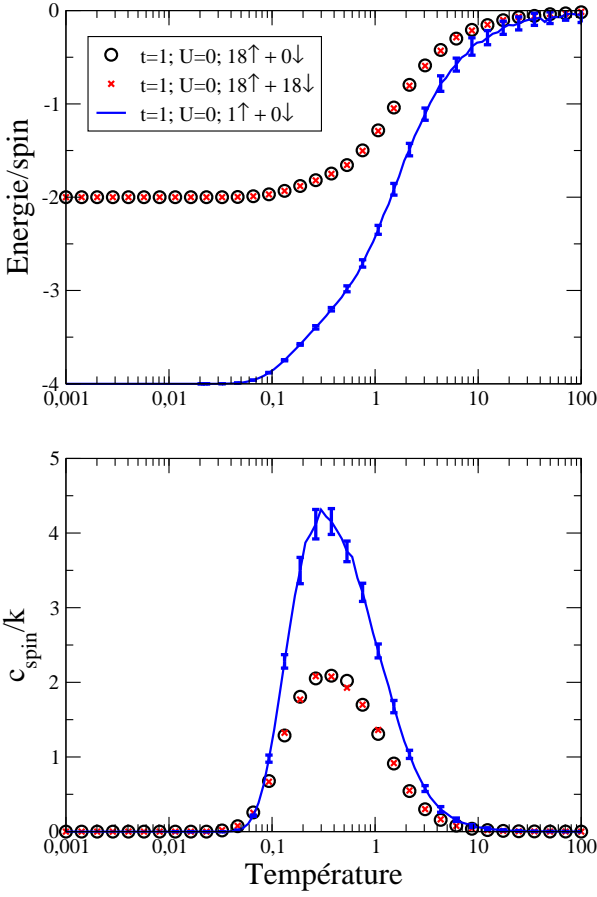


FIG. 2 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie et de chaleur spécifique par spin en fonction de la température pour $U = 0$.

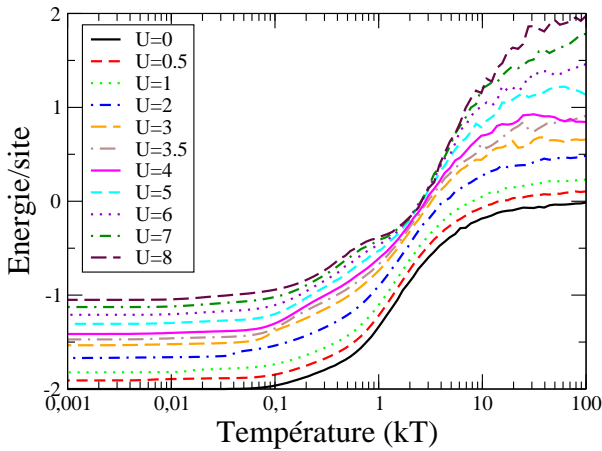


FIG. 3 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie par site en fonction de la température pour différentes valeurs de U .

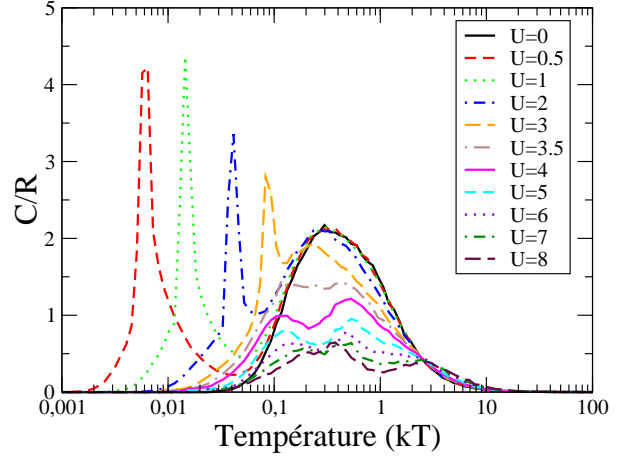


FIG. 4 – (Couleur en ligne) Courbes de chaleur spécifique molaire en fonction de la température pour différentes valeurs de U .

$U = 0$ et les trois remplissages suivants : $(1 \uparrow + 0 \downarrow)$, $(18 \uparrow + 0 \downarrow)$ et $(18 \uparrow + 18 \downarrow)$. Pour $U = 0$ le demi-remplissage $(18 \uparrow + 18 \downarrow)$ correspond à deux gaz quantiques non-corrélés qui ont les mêmes énergies et chaleurs spécifiques. Ceci explique pourquoi les courbes sont identiques pour les remplissages $(18 \uparrow + 0 \downarrow)$ et $(18 \uparrow + 18 \downarrow)$. L'énergie et la chaleur spécifique par un seul spin sur le réseau $(1 \uparrow + 0 \downarrow)$ sont les doubles des valeurs obtenues pour les remplissages précédents. Le niveau du fondamental est égal à $-4t$ comme il est prévu. En effet cet état correspond à :

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N |n_{1,\uparrow} = 0, \dots, n_{i,\uparrow} = 1, n_{i,\downarrow} = 0, \dots, n_{i+1,\uparrow} = 0, \dots, n_{N,\downarrow} = 0\rangle \quad (31)$$

dont l'énergie est donnée par

$$H|\Psi_0\rangle = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow} |\Psi_0\rangle = -4t |\Psi_0\rangle \quad (32)$$

Le rapport deux entre les grandeurs calculées pour le remplissage $(1 \uparrow + 0 \downarrow)$ et les deux autres remplissages $((18 \uparrow + 0 \downarrow)$ et $(18 \uparrow + 18 \downarrow))$ peut être justifié en considérant que pour ces deux derniers remplissages chaque spin ne peut se déplacer, en moyenne, que sur deux sites voisins alors que dans le cas d'un seul spin sur le réseau le spin a quatre possibilités de saut.

Il est intéressant de remarquer que dans le cas d'un seul spin sur le réseau le problème du signe n'existe pas, de même, l'approximation relative aux nombres d'occupation non pris en compte dans la relation (19) n'est pas utilisée. Dans ce cas la méthode n'utilise aucune approximation excepté le découpage du temps imaginaire lié à la formule de Trotter. La bonne concordance de ces résultats confirme la cohérence de la méthode de simulation.

4.3 Résultats des simulations

Les figures 3, 4, 5, 6 et 7 montrent les courbes moyennes d'énergie, de chaleur spécifique, de conductivité, du facteur

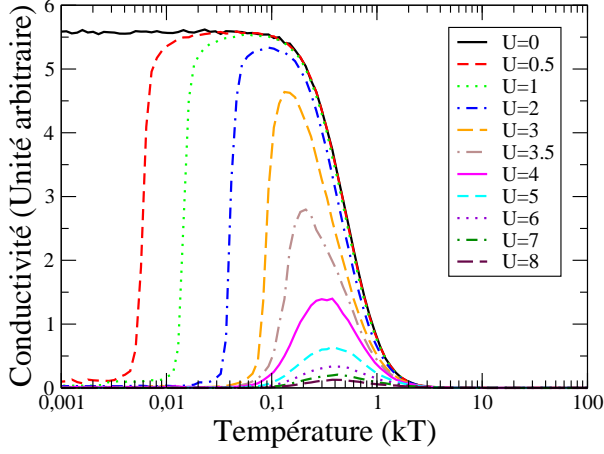


FIG. 5 – (Couleur en ligne) Courbes de conductivité en fonction de la température pour différentes valeurs de U .

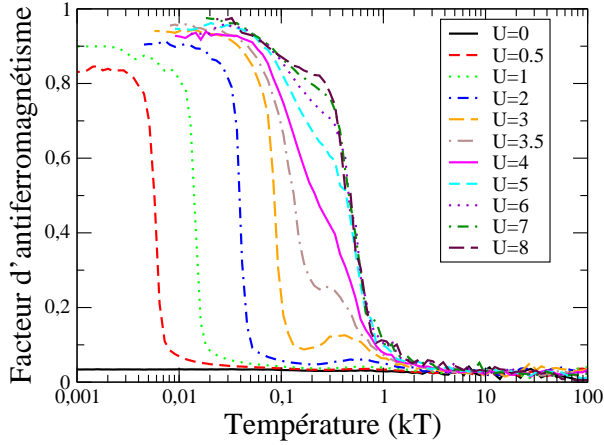


FIG. 6 – (Couleur en ligne) Courbes du facteur d'antiferromagnétisme en fonction de la température pour différentes valeurs de U .

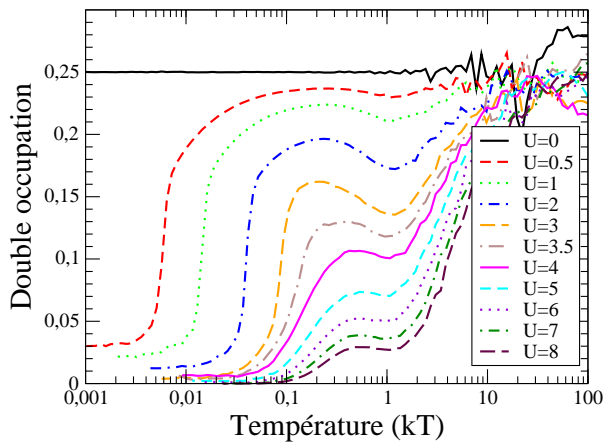


FIG. 7 – (Couleur en ligne) Courbes de double occupation en fonction de la température pour différentes valeurs de U .

d'antiferromagnétisme et de double occupation (fraction de sites occupés par une paire de spins ($\uparrow\downarrow$)). Ces courbes correspondent aux moyennes totales sur les montées et les descentes des neuf cycles de température.

Pour $U = 0$, le facteur d'antiferromagnétisme est $f_A \sim 1/N$, c'est à dire qu'il n'y a pas d'ordre magnétique quelle que soit la température.

Le facteur de double occupation

$$D = \frac{1}{N} \langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle \quad (33)$$

peut être relié à la valeur moyenne du carré de l'aimantation locale $\langle m_z^2 \rangle$. En effet, si le moment magnétique de chaque particule est choisi tel que $s_z = \pm 1$ alors, pour chaque réseau 2D :

$$\sum (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})^2 = \sum (m_z)^2 = \sum |m_z| = N_\uparrow + N_\downarrow - 2n_p \quad (34)$$

où $N_\uparrow = \sum n_{i,\uparrow}$ et $N_\downarrow = \sum n_{i,\downarrow}$ sont les nombres de spins up et down, $n_p = \sum n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$ est le nombre de paires dans un réseau 2D. Dans le cas présent, où $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2 = 18$, on obtient

$$\langle m_z^2 \rangle = 1 - 2D \quad (35)$$

On remarque qu'à basse température ($kT < t$), pour $U = 0$, le nombre de paires est exactement $n_p = 9$, c'est à dire que les spins de chaque orientation sont distribués de façon totalement aléatoire sur le réseau 2D. Ceci est en parfait accord avec le résultat relatif au facteur d'antiferromagnétisme.

On remarque un point de croisement, pour $kT \simeq 2.7t$, sur le réseau des courbes de chaleur spécifique de la figure 4. Les figures 8 à 11 représentent les courbes de chaleur spécifique, de conductivité, de facteur d'antiferromagnétisme et de carré de l'aimantation locale pour les basses températures avec une échelle de température linéaire. Pour les faibles valeurs de U , les parties décroissantes des courbes de conductivité sont assez bien approximées par des fonctions de la forme

$$\sigma(kT) \simeq \frac{a - b(kT)}{(kT)^2 + c} + d \quad (36)$$

où d est petit.

4.4 Discontinuité des courbes d'énergie

Pour les températures inférieures à environ $kT/t = 3.5$ les courbes d'énergie présentent un léger décrochement qui correspond au pic de chaleur spécifique. Des simulations avec 200 points de température dans des plages de températures autour de ces décrochements ont été réalisées pour $U = 0.5t$, $U = 1t$, $U = 2t$, $U = 3t$, $U = 3.3t$, $U = 3.5t$ et $U = 4t$. Les courbes d'énergie correspondantes (qui ne sont pas des courbes moyennes) sont présentées dans les figures 12 à 17. Les courbes moyennes de la figure 3 sont reproduites pour comparaison. Les barres d'erreur de ces courbes permettent d'évaluer les fluctuations. On remarque, sur toutes les courbes, que l'amplitude de ces barres d'erreur est faible en dehors de petites plages de température. Ces plages de température correspondent à des zones

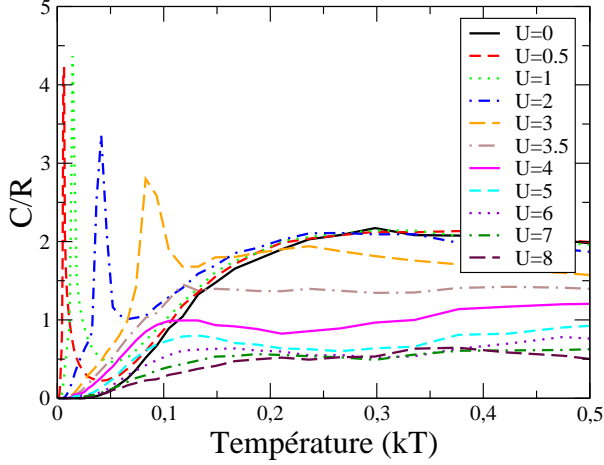


FIG. 8 – (Couleur en ligne) Courbes de la chaleur spécifique pour les basses températures.

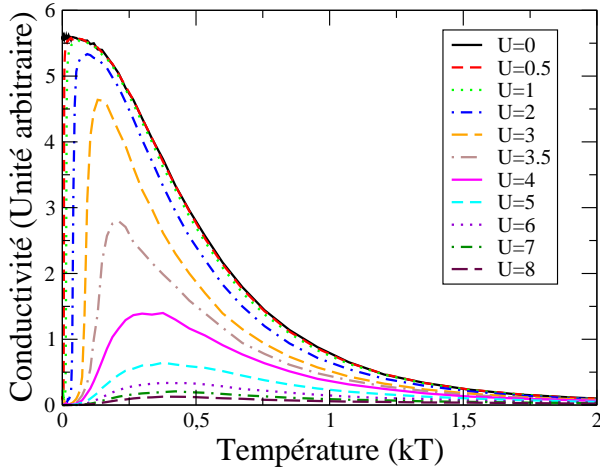


FIG. 9 – (Couleur en ligne) Courbes de la conductivité pour les basses températures.

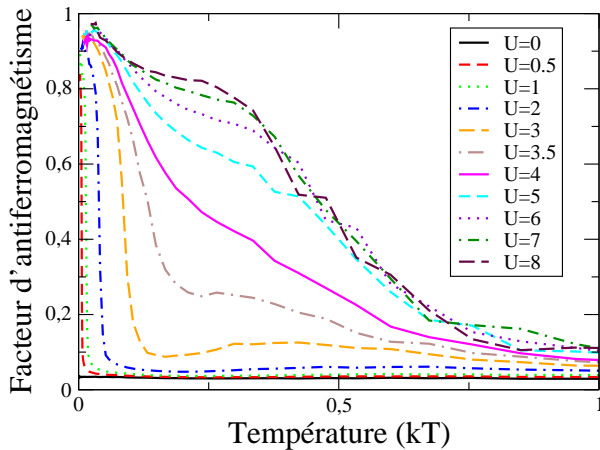


FIG. 10 – (Couleur en ligne) Courbes du facteur d'antiferromagnétisme pour les basses températures.

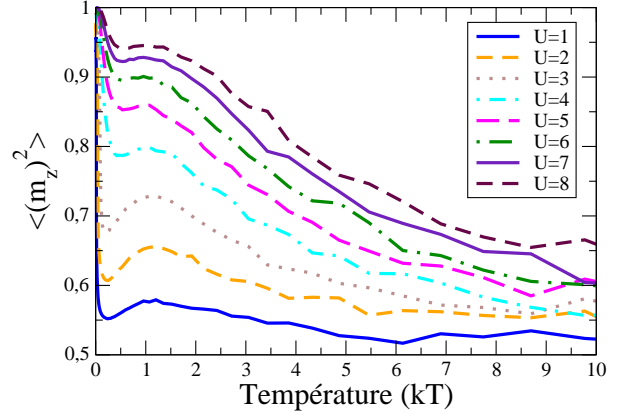


FIG. 11 – (Couleur en ligne) Courbes du carré de l'aimantation locale pour les basses températures.

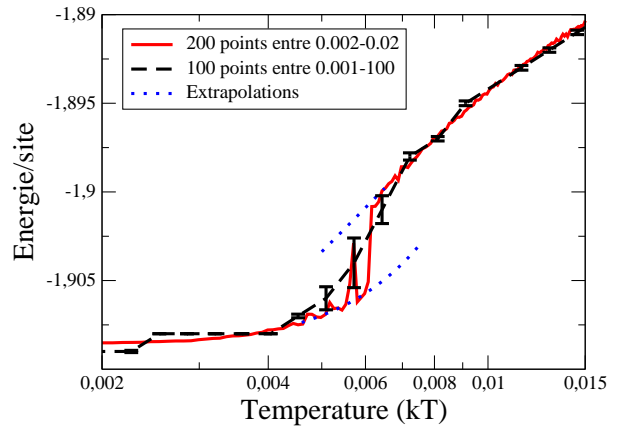


FIG. 12 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie pour $U = 0.5t$. La courbe en tiretés noirs correspond à la courbe moyenne de la figure 3 avec ses barres d'erreur.

de fluctuation sur les courbes avec 200 points de mesure. On constate que dans ces zones, les énergies fluctuent entre deux valeurs limites qui correspondent aux extrapolations des portions de courbe sans fluctuation. L'amplitude des fluctuations, qui correspond approximativement, au décrochement augmente de $U = 0.5t$ à $U = 3t$, puis diminue rapidement quand U augmente. Il n'y a plus de fluctuation pour $U = 3.5t$. L'amplitude maximum, estimée pour $U = 3t$, est d'environ $44 \cdot 10^{-3}t$. Pour $U = 3.3t$ la valeur des fluctuations d'énergie est d'environ $14 \cdot 10^{-3}t$, et l'extrapolation des courbes est trop "hasardeuse" pour présenter un intérêt.

4.5 Phénomène d'hystérésis

Les figures 18 à 23 présentent les courbes de conductivité moyennes calculées en descente et en montée de température. Ces courbes moyennes font apparaître un phénomène d'hystérésis entre la montée et la descente de température dans la zone de transition, pour les valeurs de U inférieures à $3.5t$. Bien qu'il s'agisse de courbes moyennes et que les courbes en montée de température soient comprises dans les barres d'erreur des courbes tracées en descente, la répétition systématique de ce phénomène pour

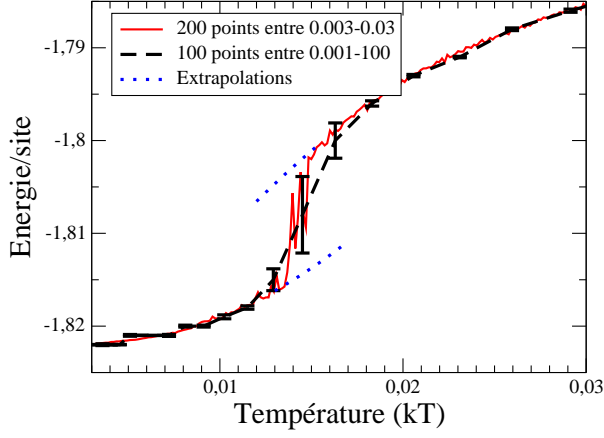


FIG. 13 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie pour $U = 1t$. La courbe en tiretés noirs correspond à la courbe moyenne de la figure 3 avec ses barres d'erreur.

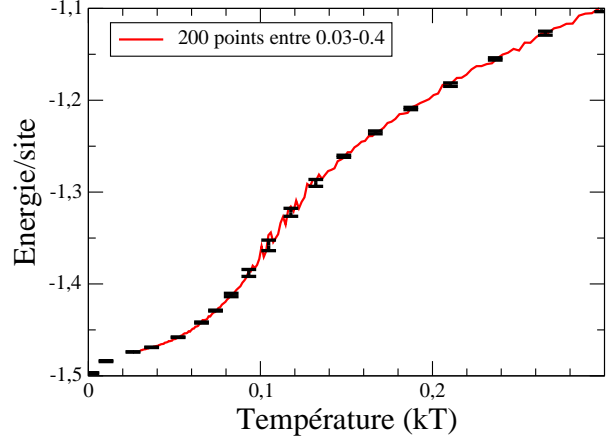


FIG. 16 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie pour $U = 3.3t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe moyenne de la figure 3.

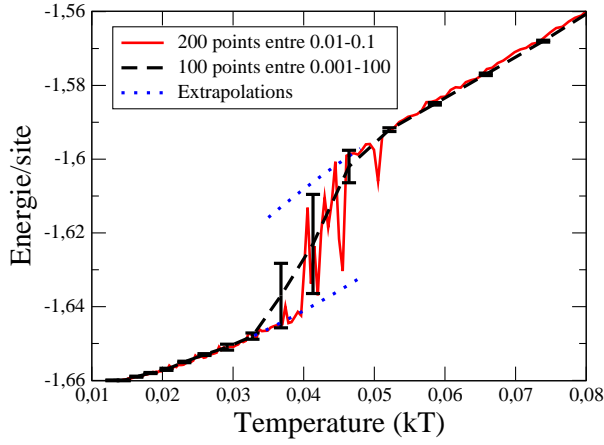


FIG. 14 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie pour $U = 2t$. La courbe en tiretés noirs correspond à la courbe moyenne de la figure 3 avec ses barres d'erreur.

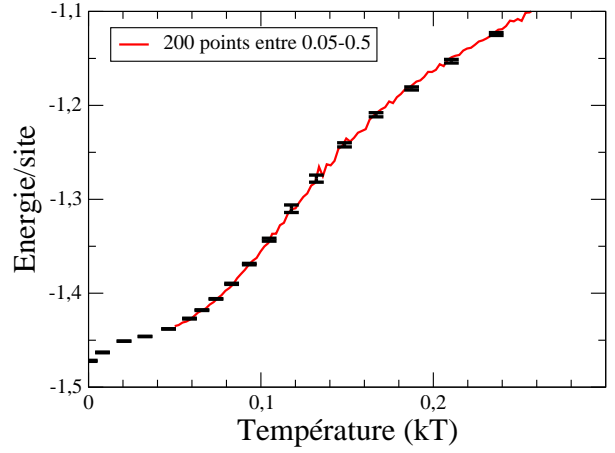


FIG. 17 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie pour $U = 3.5t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe moyenne de la figure 3.

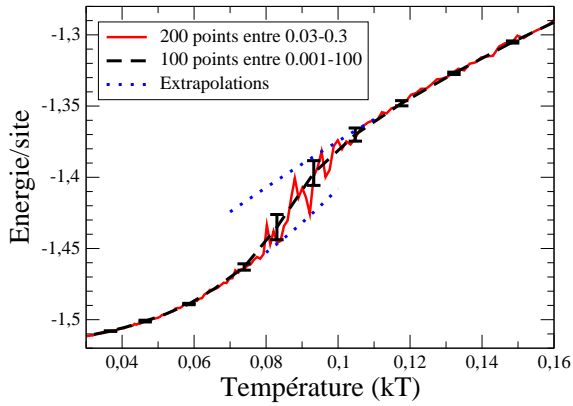


FIG. 15 – (Couleur en ligne) Courbes d'énergie pour $U = 3t$. La courbe en tiretés noirs correspond à la courbe moyenne de la figure 3 avec ses barres d'erreur.

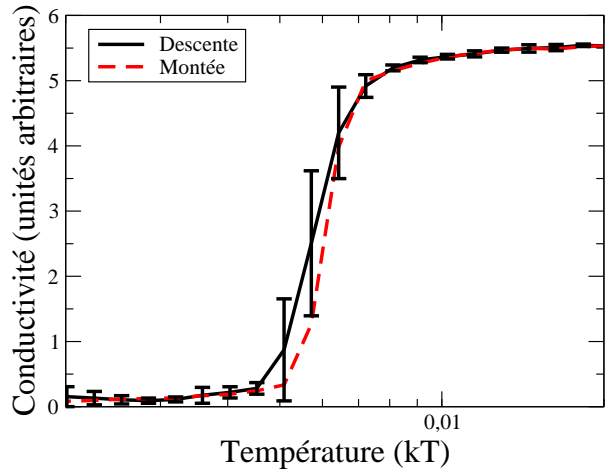


FIG. 18 – (Couleur en ligne) Courbes de conductivité en descente et en montée de température pour $U = 0.5t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe en descente de température.

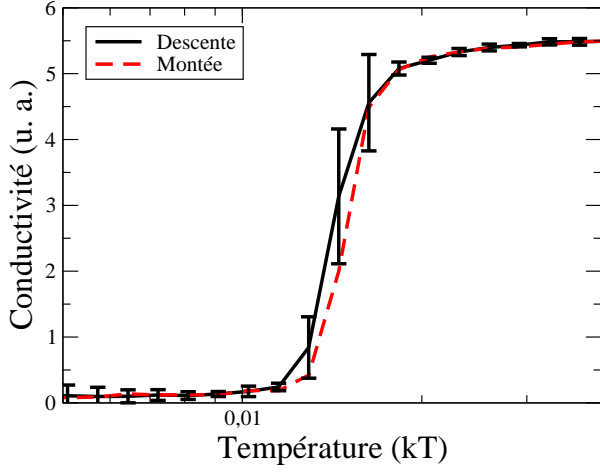


FIG. 19 – (Couleur en ligne) Courbes de conductivité descente et en montée de température pour $U = 1t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe en descente de température.

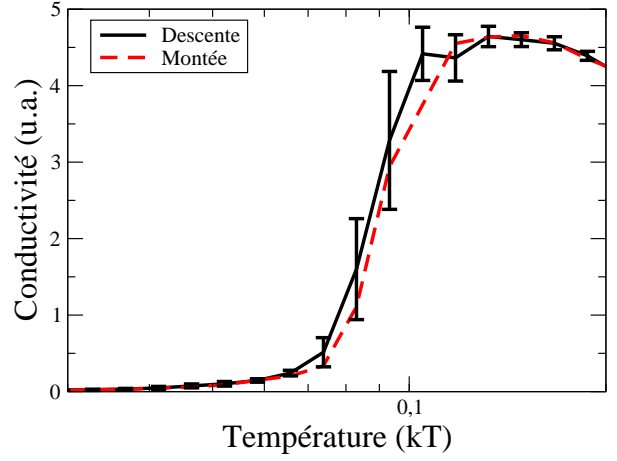


FIG. 21 – (Couleur en ligne) Courbes de conductivité en descente et en montée de température pour $U = 3t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe en descente de température.

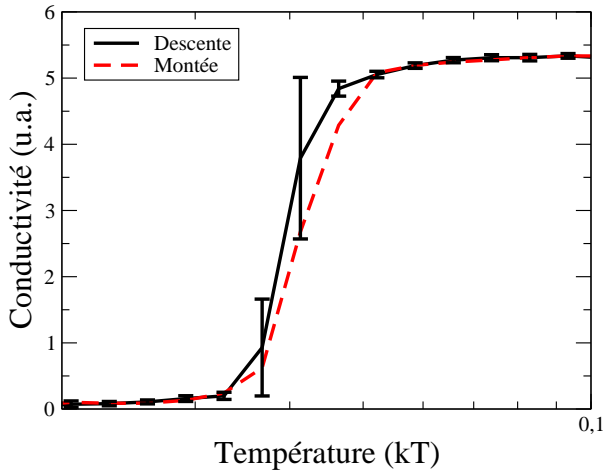


FIG. 20 – (Couleur en ligne) Courbes de conductivité descente et en montée de température pour $U = 2t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe en descente de température.

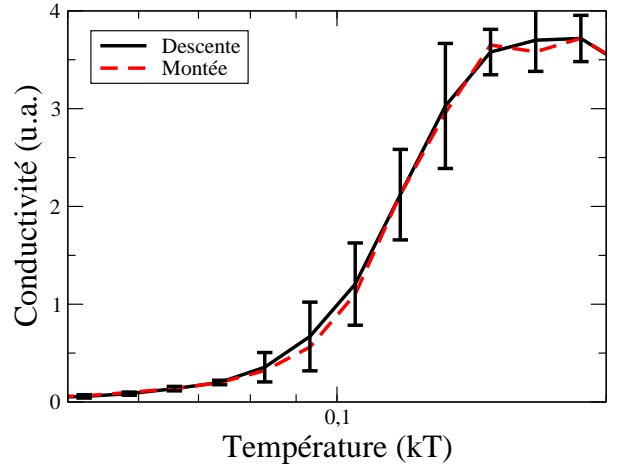


FIG. 22 – (Couleur en ligne) Courbes de conductivité en descente et en montée de température pour $U = 3.3t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe en descente de température.

toutes les valeurs de $U < 3.5t$ indique que ce n'est qu'un phénomène aléatoire. Cette mise en évidence d'un phénomène d'hystérésis doit, cependant, être considérée avec prudence. En effet, conformément au principe des méthodes de Monte-Carlo, les états générés à une température donnée ne doivent pas être fonction des états précédents. Ce phénomène d'hystérésis apparaît également sur les courbes du facteur d'antiferromagnétisme

4.6 Résultats en fonction de U/t

Comme il a été indiqué précédemment, les simulations ont été réalisées en programmant des cycles de température. Les résultats obtenus ont permis de tracer les variations de différentes grandeurs en fonction de la température. Ceci est parfaitement adapté pour mettre en évidence des transitions de phases induites par les variations de température. Par contre, la transition de Mott atter

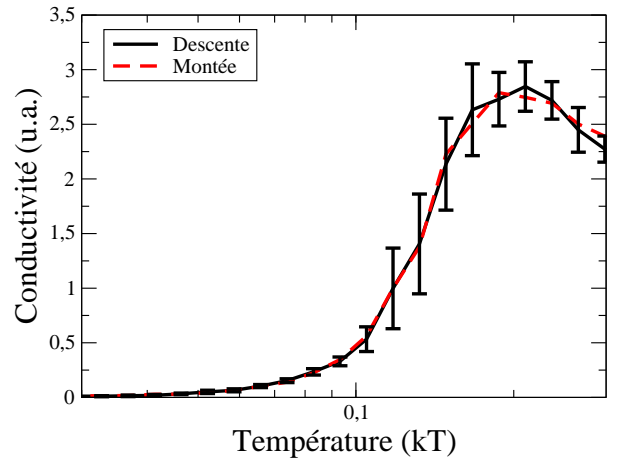


FIG. 23 – (Couleur en ligne) Courbes de conductivité en descente et en montée de température pour $U = 3.5t$. Les barres d'erreur correspondent à la courbe en descente de température.

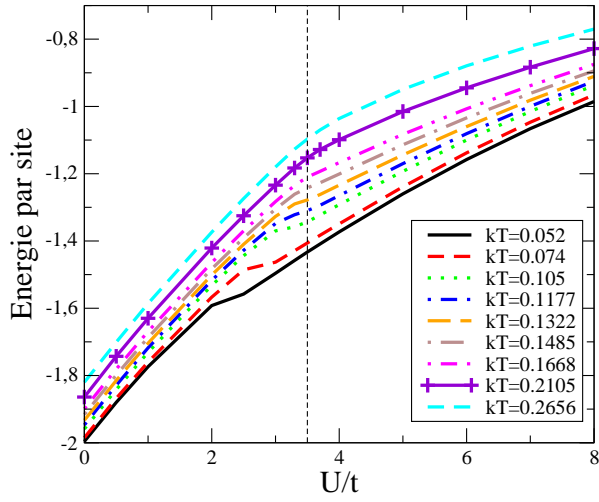


FIG. 24 – (Couleur en ligne) Isothermes d'énergie en fonction de U/t . Seuls les points sur l'isotherme $kT = 0.210$ ont été reportés. Les points sur les autres courbes correspondent aux mêmes valeurs de U/t .

due doit être, principalement, produite par les variations de l'interaction coulombienne U/t . Il est donc souhaitable de tracer l'évolution des différentes grandeurs en fonction de U/t . Ceci est indispensable si la ligne de transition est parallèle à l'axe des températures dans le plan $(U/t, kT/t)$ c'est à dire si elle n'est pas traversée en programmant des cycles de températures. Les résultats des simulations ont donc été traités pour obtenir les courbes souhaitées. Les isothermes d'énergie, de chaleur spécifique, de conductivité, du facteur d'antiferromagnétisme et de double occupation sont présentées dans les figures 24 à 30.

5 Discussion

5.1 Transition métal-insulant du premier ordre

Les courbes de chaleur spécifique de la figure 4, de conductivité des figures 5 et 9 et du facteur d'antiferromagnétisme des figures 6 et 10 font clairement apparaître une transition de phase, quand la température varie, pour les valeurs de l'interaction coulombienne telles que $U \leq 3.5$. La phase basse température est une phase isolante antiferromagnétique. La phase haute température est une phase conductrice sans ordre magnétique. Les courbes de conductivité à basse température de la figure 9 montrent que cette phase a un comportement métallique. La transition est donc une transition métal-insulant concomitante à une transition paramagnétique-antiferromagnétique. Les courbes moyennes des figures 3 à 7 ne permettent pas de déterminer avec certitude la nature de cette transition. Par contre, les figures 12 à 17 montrent clairement que les courbes d'énergie moyenne comportent un décrochement caractéristique des transitions du premier ordre. Ce décrochement est confirmé par les fluctuations des courbes avec 200 points de mesure des figures 12 à 16. En effet, ces courbes s'interprètent en considérant que, dans la plage des températures de transition, les états du système co-

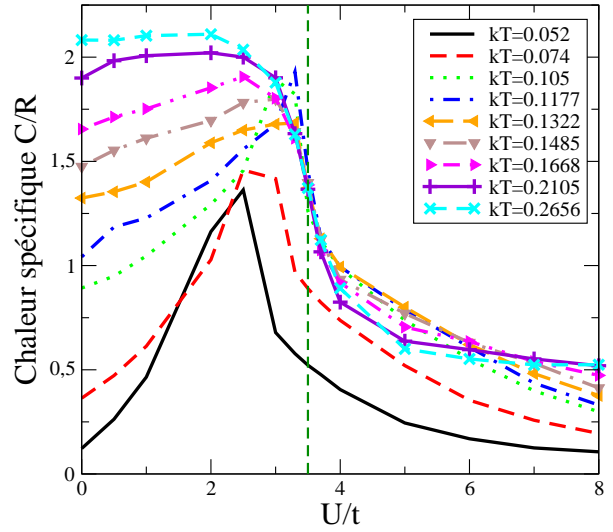


FIG. 25 – (Couleur en ligne) Isothermes de chaleur spécifique en fonction de U/t . Pour $0.2656 \geq kT \geq 0.13t$ les courbes se superposent dans la zone de transition.

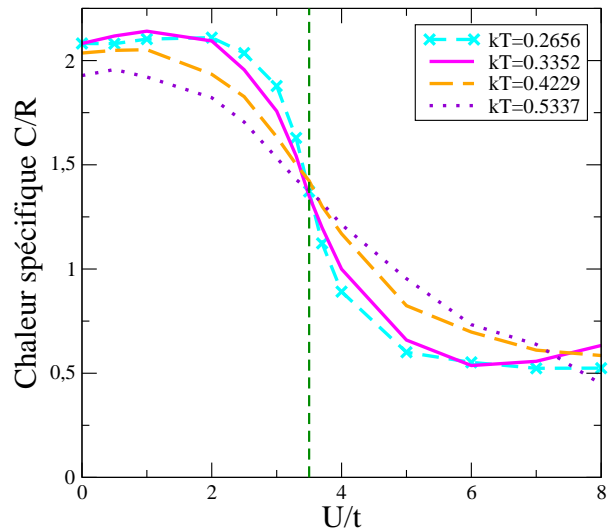


FIG. 26 – (Couleur en ligne) Isothermes de chaleur spécifique en fonction de U/t pour les hautes températures ($kT \geq 0.2656t$).

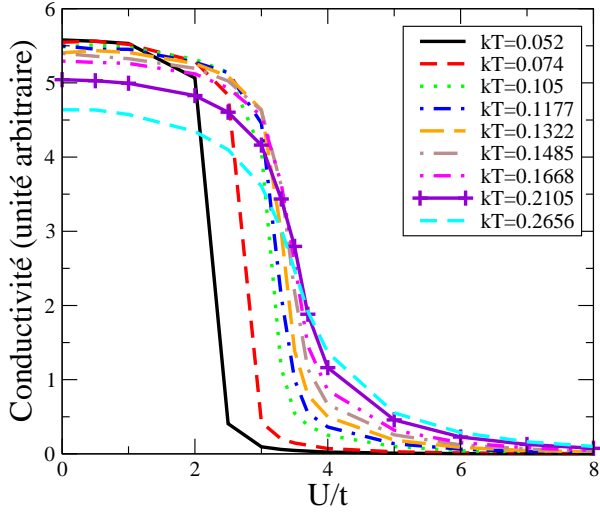


FIG. 27 – (Couleur en ligne) Isothermes de conductivité en fonction de U/t . Seuls les points sur l'isotherme $kT=0.2105$ ont été reportés. Les points sur les autres courbes correspondent aux mêmes valeurs de U/t .

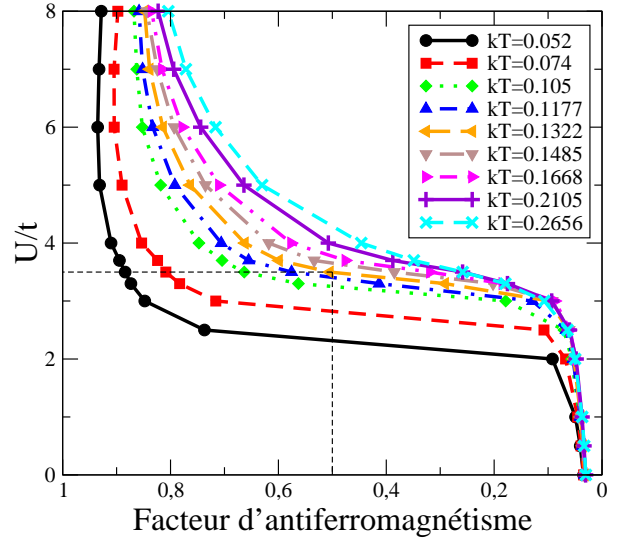


FIG. 29 – (Couleur en ligne) Isothermes du facteur d'antiferromagnétisme en fonction de U/t .

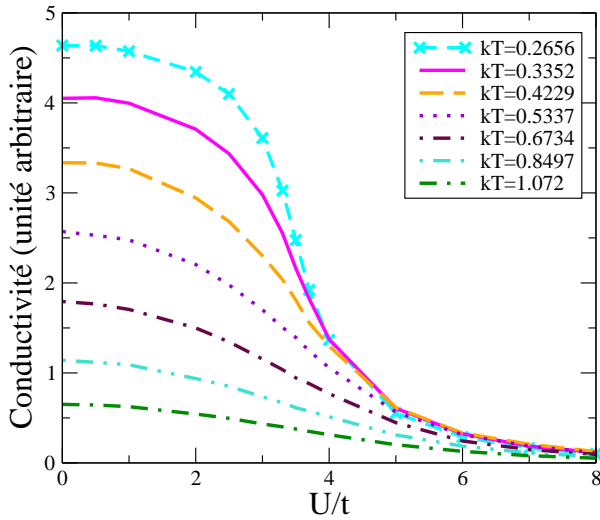


FIG. 28 – (Couleur en ligne) Isothermes de conductivité en fonction de U/t pour les hautes températures.

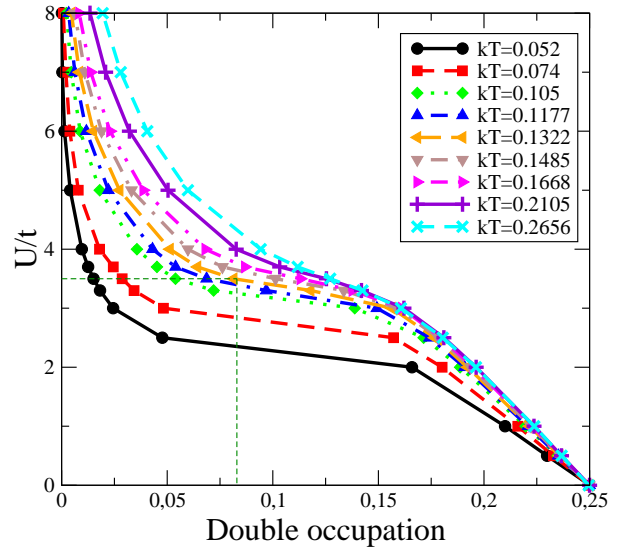


FIG. 30 – (Couleur en ligne) Isothermes de double occupation D en fonction de U/t .

respondent à deux puits de potentiels. Ainsi, les états successifs générés par l'algorithme peuvent rester "bloqués" longtemps dans un des puits de potentiel. Ceci justifie que les valeurs de l'énergie fluctuent entre deux valeurs limites. Il y a donc un phénomène de métastabilité entre deux états macroscopiques possibles du système. Ce phénomène de métastabilité et le phénomène d'hystérésis observé sur les courbes de conductivité sont également des propriétés caractéristiques des transitions du premier ordre. On peut donc conclure, sans aucun doute, que la transition est du premier ordre. On en déduit que les pics de chaleur spécifique ne sont pas correctes. De même, les valeurs moyennes des autres grandeurs ne sont pas exactes dans les plages de températures où il y a le phénomène de métastabilité. En effet, dans la zone de transition, les configurations générées par l'algorithme qui sont retenues pour calculer les différentes grandeurs, sont des états microscopiques des deux phases. C'est à dire que le système "oscille" entre les deux phases. Ce phénomène de métastabilité signifie que le système n'est pas à l'équilibre thermodynamique, donc la relation 25 qui permet de calculer la chaleur spécifique ne peut pas être utilisée. La singularité mathématique attendue sur la courbe de chaleur spécifique d'une transition du premier ordre est un saut ou décrochement comme pour l'énergie.

5.2 Point critique

Comme cela a été remarqué précédemment, un changement de comportement se produit pour $U \simeq 3.5t$. Cette valeur est la valeur limite d'une ligne de transition du premier ordre dans le plan $(U/t, kT/t)$. La température correspondante, à mi-hauteur du pic, est environ $kT/t \simeq 0.13$. Ces deux valeurs sont les coordonnées du point critique qui termine la ligne de transition du premier ordre. Les températures des points de cette ligne de transition sont également déterminées à mi-hauteur des pics. Le réseau d'isothermes de la figure 29 confirme qu'il s'agit bien d'un point critique analogue à celui observé pour les transitions liquide-gaz.

On remarque, sur les figures 29 et 30, que les paliers des isothermes telles que $kT/t < 0.1322$ ne sont pas parallèles à l'axe des "x". Ceci est dû à la méthode de Monte-Carlo. En effet, comme cela a été indiqué précédemment, dans une zone de transition du premier ordre cette méthode génère des états des deux phases possibles, ainsi les moyennes obtenues ne correspondent pas à une seule phase. On obtient alors des valeurs intermédiaires entre les valeurs relatives à chaque phase. Il faudrait, pour contourner ce problème, sélectionner les configurations retenues en ne gardant que celles correspondant à une seule phase, c'est à dire à un puits de potentiel. Malheureusement, il apparaît difficile de déterminer à quelle phase correspond une configuration générée. Aussi, quels que soient les nombres de points reportés sur les courbes, les paliers ne seront jamais parfaitement parallèles à l'axe des "x".

5.3 Transition de Mott

Alors que les réseaux d'isothermes du facteur d'antiferromagnétisme de la figure 29 et du facteur de double occu-

pation de la figure 30 confirment l'existence du point critique ($U/t \simeq 3.5$, $kT/t \simeq 0.13$), les isothermes de conductivité et de chaleur spécifique des figures 27 et 25 font apparaître un saut de conductivité associé à un saut de chaleur spécifique pour les températures $0.2656t \geq kT \geq 0.13t$. Ce saut se produit pour la valeur constante $U/t \simeq 3.5$, à mi-hauteur du décrochement. Les figures 26 et 28 montrent que pour les températures $kT > 0.2656$ ce saut disparaît, les courbes présentent alors un point d'inflexion. Cette discontinuité doit correspondre à une transition métal-isolant de Mott. La présence de cette transition est également observée sur les isothermes d'énergie de la figure 24. En effet, ces courbes présentent un point anguleux pour la valeur de l'interaction coulombienne $U/t \simeq 3.5$. Cependant, les résultats ne permettent pas de déterminer de façon certaine la nature de cette transition. Etant donné le changement de comportement observé sur les courbes des figures 26 et 28 pour les températures $kT \geq 0.2656t$, on peut supposer que la transition est encore du premier ordre dans l'intervalle de température $0.1322 - 0.2656$. Le point ($U/t = 3.5$, $kT/t = 0.2656$) serait alors un point critique sur la ligne de transition de Mott. Dans cette hypothèse, les deux lignes de transition du premier ordre doivent se rejoindre en un point triple proche du point critique de la transition isolant antiferromagnétique-conducteur paramagnétique.

5.4 Diagramme de phase

On peut considérer que la valeur moitié de la conductivité maximum est la valeur limite entre le comportement conducteur et le comportement mauvais conducteur. Ainsi pour des valeurs de la conductivité légèrement supérieures le système se comporte comme un conducteur tandis que pour des valeurs légèrement inférieures le système peut être qualifié de mauvais conducteur. La ligne en pointillés (rouge) de la figure 31 correspond à cette limite de comportement.

Les courbes de conductivité montrent que le système est isolant et paramagnétique, quel que soit U , quand $kT > 2t$. Cependant, les courbes de la figure 7 montrent que ces états paramagnétiques sont caractérisés par des nombres de double occupation différents. De même on constate que le système est isolant, quelle que soit la température pour $U \gtrsim 8t$, mais le système est antiferromagnétique à basse température et devient progressivement paramagnétique quand la température augmente. Ce passage isolant antiferromagnétique-isolant paramagnétique se produit sans qu'il y ait de transition, au sens thermodynamique, détectable sur toutes les grandeurs calculées dans nos simulations. Ceci est peut être dû à la petite taille du réseau.

Comme pour le changement de comportement conducteur-mauvais conducteur, on peut considérer que le système présente une tendance au ferromagnétisme pour $f_A > 0.5$ et au paramagnétisme pour $f_A < 0.5$. Ceci permet de tracer une ligne de "cross-over" entre les deux phases magnétiques.

Selon les hypothèses précédentes le diagramme de phase dans le plan $(U/t, kT/t)$ comprend, donc, une première ligne de transition du premier ordre pour $kT/t < 0.13$ et

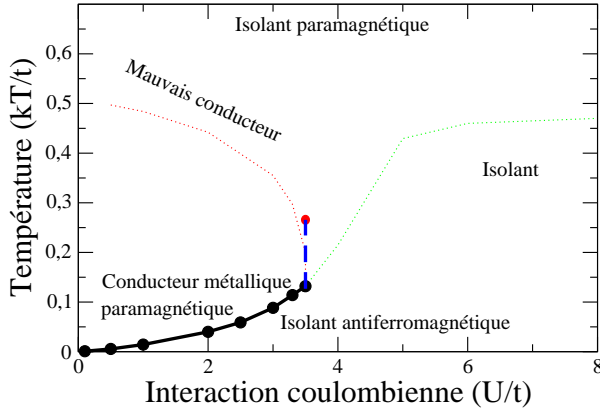


FIG. 31 – (Couleur en ligne) Allure générale du diagramme de phase du modèle de Hubbard 2D à demi-remplissage. Les lignes en pointillés (rouge) et (vert) sont des lignes de “cross-over”. La ligne en trait plein (noir) est la ligne de transition du premier ordre isolant antiferromagnétique-conducteur paramagnétique. La ligne en tirets (bleu) correspond à la transition de Mott.

$U/t < 3.5$ et une deuxième ligne de transition du premier ordre pour $0.2656 \geq kT \geq 0.13$, cette ligne étant parallèle à l’axe des températures. Ces deux lignes se rejoignent en un point triple. Les deux lignes de “cross-over” définies précédemment peuvent compléter le diagramme. Toutes ces considérations permettent de tracer le diagramme de phase de la figure 31.

5.5 Comparaison avec quelques résultats de la littérature

La transition basse température métal paramagnétique - isolant antiferromagnétique a effectivement été observée expérimentalement sur un certain nombre de composés, notamment V_2O_3 [29, 31, 32]. Cette transition est effectivement du premier ordre. Les résultats obtenus en faisant varier la pression mettent en évidence une transition métal-isolant à haute température qui correspond à la transition de Mott. Cette transition est également une transition du premier ordre. Les résultats de nos simulations sont donc en bon accord qualitatif avec l’expérience. Les diagrammes de phases expérimentaux font également apparaître une ligne de transition entre la phase isolante antiferromagnétique et la phase isolante paramagnétique. Cette transition n’a pas été détectée dans nos simulations. Ces différences peuvent être, éventuellement, justifiées en considérant que le modèle étudié est un modèle 2D alors que les résultats expérimentaux concernent des matériaux 3D. De même, l’influence de l’interaction coulombienne U n’est certainement pas totalement équivalente à celle de la pression.

De nombreux résultats de simulations et d’études théoriques du modèle de Hubbard 2D ont été publiés. Nous ne considérerons que quelques un de ces articles qui présentent les courbes des mêmes grandeurs que celles calculées dans nos simulations. De façon générale, on remarque que l’allure de notre diagramme de phases est proche de celle des diagrammes obtenus par d’autres méthodes, pour des

modèles non frustrés. En particulier, on constate que le point critique que nous avons déterminé correspond au point triple du diagramme de phases de la référence [3]. Les courbes d’énergie et de chaleurs spécifiques ont également une allure générale très proches de celles présentées dans les références [4, 6, 8, 11, 14]. Mais les résultats de ces références ne font pas apparaître les sauts de l’énergie qui permettent de déterminer la nature de la transition. On constate également que les courbes du carré de l’aimantation locale $\langle m_z^2 \rangle$ de la figure 11 ont la même allure que celles présentées dans la référence [14]. Cependant, une différence apparaît. En effet nos courbes présentent, à basse température, des variations qui correspondent à la transition métal-isolant du premier ordre alors que cette transition n’est pas détectée dans la référence.

Gröber et al. [18] ont réalisé des simulations de Monte-Carlo quantique du modèle 2D de Hubbard (8×8) en faisant varier la valeur de l’interaction coulombienne U pour la température $T = 0.33t$. Ils ont mis en évidence une transition métal paramagnétique-isolant pour la valeur critique $U_c \approx 4t$. Cette valeur critique est proche de la valeur $U \simeq 3.5t$ que nous avons obtenue.

6 Conclusion

Comme toute méthode numérique, la méthode employée pour nos simulations utilise des approximations qui permettent de réduire considérablement les calculs. La validité des résultats obtenus peut être mise en doute à cause de ces approximations. Mais la cohérence des résultats et le bon accord qualitatif avec un certain nombre de résultats obtenus avec d’autres méthodes numériques, avec les prédictions théoriques et les résultats expérimentaux permet de considérer que ces résultats sont significatifs.

Le Modèle de Hubbard 2D étudié fait apparaître deux transitions : une transition du premier ordre métal paramagnétique - isolant antiferromagnétique à basse température et la transition de Mott métal paramagnétique-isolant paramagnétique pour $0.2656 \geq kT/t \geq 0.13$. Par contre, le passage isolant antiferromagnétique-isolant paramagnétique se produit sans transition de phase détectable sur les grandeurs étudiées. Il est possible que l’effet de taille ne permette pas d’observer tous les “détails” du comportement du modèle qui semble être compliqué autour du point critique.

Références

- [1] C. Castellani, C. Di Castro, D. Feiery, J. Ranninger, Phys. Rev. Lett. **43**, 26, 1957 (1979).
- [2] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **31**, 7, 4403 (1985).
- [3] Th. Pruschke, D. L. Cox, M. Jarrell, Phys. Rev. B **47**, 7, 3553 (1993).
- [4] P. de Vries, K. Michielsen, H. De Raedt, Z. Phys. B, **92**, 353 (1993).
- [5] G. Moeller, Q. Si, G. Kotliar, M. Rozenberg, Pys. Rev. Lett. **74**, 11, 2082 (1995).

- [6] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 1, 13 (1996).
- [7] A. Georges, S. Florens, T. A. Costi, cond-mat/0311520.
- [8] D. Duffy, A. Moreo, Phys.Rev. B **55**, 19, 12918 (1997).
- [9] F. Mancin, H. Matsumoto, D. Villani, J. Phys. studies, **3**, 4, 474 (1999).
- [10] M. J. Rozenberg, R.C. Koltliar, G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **83**, 17, 3498 (1999).
- [11] Thereza Paiva, R. T. Scalettar, Carey Huscroft and A. K. McMahan, Phys. Rev. B **63**, 21, 125116 (2001).
- [12] S.Moukouri, M. Jarrel, Phys. Rev. Lett. **87**, 16, 167010 (2001).
- [13] F. Dolcini, A. Montosi, arXiv :cond-mat/0110264v1, (2001).
- [14] K.Aryanpour, W. E. Pickett, R. T. Scalettar, Phys. Rev. B , **74**, 085117 (2006).
- [15] Y. M. Vilk, A.-M. S. Tremblay, J. Phys. I **7**, 1309-1368 (1997).
- [16] S. Allen, A.-M. S. Tremblay, Phys.Rev. B **64**, 075115 (2001).
- [17] B. Kyung, A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. Lett. **97**, 046402 (2006).
- [18] C. Gröber, M. G. Zacher, R. EDer, cond-mat/9810246.
- [19] N. F. Mott, rev. mod. phys. **40**, 4, 677 (1968).
- [20] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino and R. L. Sugar, Phys. Rev.D **24**, 8, 2278 (1981).
- [21] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loth, J. E. Gubernatis and R. T. Scaletta, Phys. Rev. B **40**, 1, 506 (1989).
- [22] M. Suzuki, Progress of Theoretical Physics, **56**, 5, 1454 (1976).
- [23] M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Prog. Theor. Phys., **58**, 5, 1377 (1977).
- [24] J. E. Hirsch, D. J. Scalapino, R. L. Sugar and R. Blankenbecler, Phys. Rev. Lett. **47**, 22, 1628 (1981).
- [25] J. E. Hirsch, R. L. Sugar, D. J. Scalapino and R. Blankenbecler, Phys. Rev. B **26**, 9, 5033 (1982).
- [26] B. Martinie, cond-mat/0801.4352.
- [27] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, D. Toussaint, Phys. Rev. B **39**, 4711 (1989).
- [28] D. J. Scalapino, S. R. White and S. C. Zhang, Phys.Rev. Lett. **68**, 18, 2830 (1992).
- [29] M. Foex, C. R. Acad. Sci. III **223**, 1126 (1946).
- [30] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman, T. M. Rice, Phys. Rev. B **7**, 1920 (1973).
- [31] P. Limelette, A. Georges, D. Jérôme, P. Wzietek, P. Metcalf, J. M. Honig, Science **302**, 89 (2003).
- [32] H. Kuwamoto, J. M. Honig, J. Appel, Phys. Rev. B **22**, 6, 2626 (1980).